N 型 $Mg_3(Sb, Bi)_2$ における超低有効質量電子状態を利用したバンドエンジニアリング

Ultra-light-mass band engineering in N-type Mg_3Bi_2-based materials

パナソニック株式会社　○山村 諒祐，金子 由利子，菅野 勉，玉置 洋正

Panasonic Corp., ○Ryosuke Yamamura, Yuriko Kaneko, Tsutomu Kanno, Hiromasa Tamaki

E-mail: yamamura.ryosuke@jp.panasonic.com

2016 年に本グループが報告した N 型 Mg_3Sb_2 化合物は、現在商用利用されている Bi_2Te_3 に代わる、安価で高性能な熱電変換材料の候補として注目を集めている[1]。近年、N 型 Mg_3Sb_2-Mg_3Bi_2 固溶体において、Bi 比率の高い組成で室温付近における高い熱電変換性能が報告されている[2]。N 型の熱電物性の主役は 6 重縮退した CB_1 バンドであるが、Mg_3Bi_2 側において更に Γ 点の 1 重縮退した伝導帯バンド(Γ バンド)とのバンドコンバージェンスが起きる可能性も議論されている[3, 4]。そこで我々は、$Mg_3(Sb, Bi)_2$ 固溶体に対して、第一原理計算による電子状態の解析及び、CB_1 バンドと Γ バンドの双方を取り入れたボルツマン輸送モデルから、熱電変換性能の評価を行った。

第一原理計算の結果、Bi の比率を増やすにつれて Γ バンド準位が下降し、CB_1 バンドに接近する(Fig. 1)。だが Mg_3Bi_2 においても、Γ バンドは CB_1 バンドの 50meV 上方に存在し、バンドコンバージェンスは実現しなかった(Fig. 2)。一方、Γ バンドは強いスピン軌道相互作用の影響により、Kane 型の非パラボリックな分散を持ち、有効質量が CB_1 バンドの 1/10 程度であることを見出した。この非常に軽い有効質量により、Γ バンドは 1 重縮退にも関わらず、6 重縮退の CB_1 バンドに匹敵する電気伝導性を有する。その結果、Γ バンドはフェルミ面上に現れずとも電気伝導に寄与し、Mg_3Bi_2 近傍のパワーファクターを 30 μW/cmK2 程度まで向上させることを予測した。本講演では、第一原理計算による計算予測に加え、実験結果との比較についても議論する。

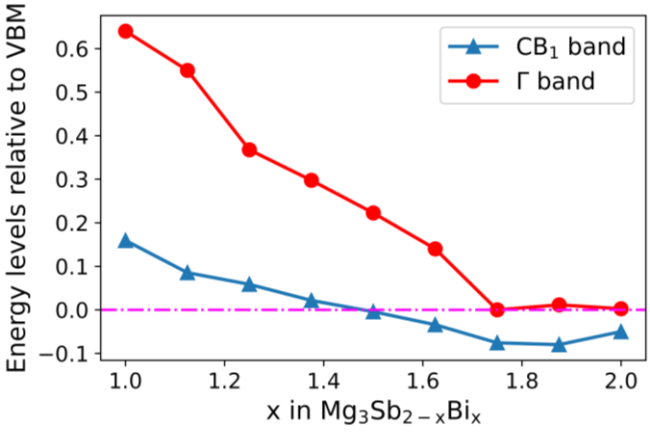

Fig. 1: Energy levels relative to valence band maximum (VBM) near Γ -point for $Mg_3Sb_{2-x}Bi_x$.

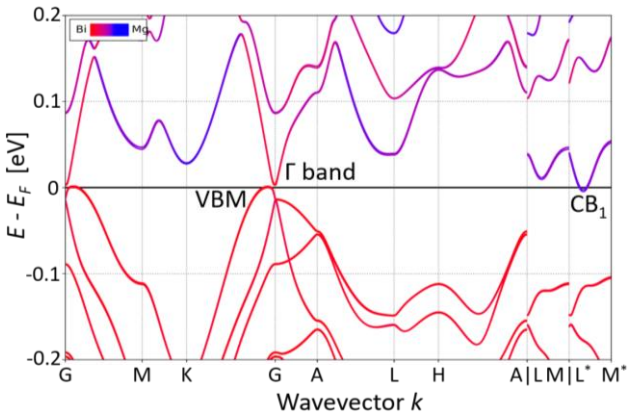

Fig. 2: Band structure of Mg_3Bi_2.

[1]. H. Tamaki, H.K. Sato, and T. Kanno, Adv. Mater **28**, 10182 (2016).

[2]. Z, Han et al., Research, **2020**, 1672051 (2020).

[3]. K. Imasato et al., Energy Environ. Sci. **12**, 965 (2019).

[4]. J. Zhang and B.B. Iversen, J. Appl. Phys. **126**, 085104 (2019).

© 2021年 応用物理学会